



تفاصيل البحث:

عنوان البحث : التركيب الإلكتروني والطيف لبعض مشتقات 5-بيرازولون
Electronic structure and spectra of some arylazopyrazolin 5-one derivatives

الوصف : يحتوي هذا العمل على دراسة كاملة ووافية للتركيب الإلكتروني والطيفي لبعض مشتقات 3-أمينو، 3-ترافلوروميثيل بيرازولون. الهدف الرئيسي لهذا العمل هو التركيز على العوامل التركيبية المؤثرة على النشاط الصناعي لهذه الأصباغ. قد تم تعيين التركيب الإلكتروني في الحالة المستقرة (الأرضية) لمركبات 3-أمينو، 3-ترافلوروميثيل بيرازولون باستخدام طرق حسابية ab-initio عند مستوى RHF وباستخدام قواعد مجموعات مختلفة مثل 6-31G، *31G** تمت دراسة جميع الأشكال التوتوميرية لمركبات 3-أمينو، 3-ترافلوروميثيل بيرازولون. وقد أثبتت نتائج الحسابات الجزيئية باستخدام قاعدة المجموعة RHF/6-31G* أن الشكل الحلقي هيدرازوفينيل بيرازولون هو أكثر الأشكال التوتوميرية ثباتا من كيتو-أزو، إينول-أزو. كما تمت دراسة تأثير مجموعات استبدال مختلفة القوة على التركيب الإلكتروني للمركبات باستخدام طريقة AM1-MO التقريبية. وقد تم استعراض نتائج الحسابات الجزيئية بالمقارنة مع طاقة التأين، طاقة القابلية الإلكترونية، الشحنة المتركزة على المراكز المهمة من المركب وكذلك العزم القطبي. تم قياس طيف الامتصاص للمركبات تحت الدراسة في منطقتي الأشعة فوق البنفسجية والمرئية وذلك باستخدام مذيب قطبي (ميثانول) وكذلك مذيب غير قطبي (دايوكسان). كما تم إعداد دراسة مقارنة بين المشاهدات التجريبية والحسابات النظرية بالإضافة إلى توضيح وتعيين كمي لكل الإنتقالات الإلكترونية.

نوع البحث : رسالة ماجستير

سنة البحث : 2007

الناشر : جامعة الملك عبد العزيز

المشرف : أ.د.حسين محمد مصطفى ، د. فوزية محمد النوبصري

تاريخ الإضافة على الموقع : Monday, June 09, 2008

الصفحة الرئيسية

عمادة الكلية

وكالات الكلية

إدارة الكلية

الشؤون التعليمية

الأقسام العلمية

المعامل

مجلة كلية العلوم

الخدمات

الأنظمة الإلكترونية (ODUS)

اتصل بالكلية

دليل المنسولين

الملفات

الأبحاث

المواد

مواقع مفضلة

عدد زيارات هذه الصفحة: 14



الباحثون:

اسم الباحث (عربي)	اسم الباحث (انجليزي)	نوع الباحث	المرتبة العلمية	البريد الالكتروني
سهى محمد علي البخاري		باحث	.	